

0716518-/

КАЗАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

На правах рукописи

УДК 536.764

ПРУДНИКОВ ВЛАДИМИР ВАСИЛЬЕВИЧ

ТЕОРЕТИКО-ПОЛЕВОЕ ОПИСАНИЕ И КОМПЬЮТЕРНОЕ  
МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИТИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ  
ОДНОРОДНЫХ И НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМ

Специальность 01.04.02 – теоретическая физика.

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени  
доктора физико-математических наук

КАЗАНЬ – 2000

Работа выполнена в Омском государственном университете

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук, профессор СОКОЛОВ А.И.

доктор физико-математических наук, профессор ЩУР Л.Н.

доктор физико-математических наук, профессор ЮЛЬМЕТЬЕВ Р.М.

Ведущая организация:

Институт неорганической химии СО РАН

НАУЧНАЯ БИБЛИОТЕКА  
КФУ



0000947780

Защита состоится "27" апреля 2000 г. в 14<sup>30</sup>  
на заседании диссертационного совета Д 053.29.02 по присуждению  
ученых степеней по физике при Казанском государственном  
университете (420008, г. Казань, ул.Кремлевская, 18).

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке  
Казанского государственного университета.

Автореферат разослан "20" марта 2000 г.

Ученый секретарь

диссертационного совета, д.ф.-м.н., проф.

A handwritten signature in dark ink, consisting of stylized cursive letters.

М.В.Еремин

## Общая характеристика работы

Актуальность темы Проблема фазовых переходов второго рода и связанных с ними критических явлений является одной из наиболее интересных и актуальных задач физики конденсированного состояния. Наблюдаемые по мере приближения к точке фазового перехода аномально большие по амплитуде и долгоживущие флуктуации некоторых термодинамических переменных характеризуются эффективно сильным взаимодействием между собой. В результате любое слабое взаимодействие становится вблизи критической точки настолько сильным, что не позволяет применять теорию возмущений. Выявленная общность свойств фазовых переходов второго рода в различных веществах позволила сформулировать принцип универсальности критических явлений и предложить модель, в основе которой лежала гипотеза масштабного подобию флуктуаций (А.З.Паташинский, В.Л.Покровский, 1964, 1966; Л.Каданов, 1966). Идеи использования метода ренормализационной группы и последующая их иллюстрация с помощью метода  $\epsilon$  - разложения (К.Вильсон, М.Фишер, 1971, 1972) позволили сделать еще несколько шагов в качественном понимании фазовых переходов и в их количественном описании. Дальнейшее развитие этих идей привело к появлению теоретико-полевого подхода к описанию критических явлений (С.Ди Кастро, Г.Иона-Лазинио, Г.Паризи, С.Л.Гинзбург, 1975), дающему более точные количественные результаты для непосредственно трехмерных систем при применении методов суммирования асимптотических рядов (Г.Бейкер, Б.Никел и др., 1976; Е.Врезин и др., 1977).

В критической точке наряду с особенностями равновесных характеристик сингулярное поведение демонстрируют кинетические коэффициенты и динамические функции отклика, что обусловлено аномально большими временами релаксации сильно флуктуирующих величин. Критическая динамика исследовалась ренормгрупповыми методами, совмещенными с  $\epsilon$ -разложением, в работах ряда авторов (В.Гальперин, П.Хоэнберг, Ш.Ма, 1972, 1974; Ж.Мазенко, К.Кавасаки, 1975 и др.). Однако исследование динамических свойств критических флуктуаций сталкивается с трудностями более сложными, чем при описании равновесных свойств. Это вызвано как необходимостью учета взаимодействия флуктуаций параметра порядка с другими долгоживущими возбуждениями (В.Гальперин, П.Хоэнберг, 1967; А.М.Поляков, К.Кавасаки, 1969), так и более слабой сходимостью получаемых рядов по  $\epsilon$  и большим числом существенных диаграмм уже в низших порядках теории возмущений. В динамике фазовых переходов и понятие универсальности приобретает более широкий смысл - становятся существенными также законы сохранения для локальной плотности долгоживущих флуктуирующих переменных. В последние годы для описания критической динамики в однородных и неупорядоченных системах удалось развить теоретико-полевого вариант ренормгруппы, позволяющий исследовать динамику трехмерных и двумерных систем без использования  $\epsilon$ -разложения (В.В.Прудников, А.Н.Вакилов, 1992; К.Ёрдинг, 1995). В

этом плане работа автора диссертации явилась пионерской. Однако достигнутая в ней точность определения динамических характеристик значительно уступает достигнутой точности описания статического критического поведения.

В последние годы усилия многих исследователей были направлены на понимание того, как характеристики фазовых переходов изменяются с введением в систему случайно распределенных примесей. Рассеяние флуктуаций на дефектах структуры, вызывающих нарушение трансляционной инвариантности системы, обуславливает дополнительное взаимодействие флуктуаций параметра порядка, характеризующееся специфическими законами сохранения. Особенно интересно влияние замороженных дефектов, чье присутствие может проявляться в виде случайного возмущения локальной температуры перехода, например, для ферро- и антиферромагнитных систем в отсутствие внешнего магнитного поля или как случайные магнитные поля для антиферромагнитных систем в однородном магнитном поле.

Наибольших успехов исследователи достигли при изучении влияния точечных  $\delta$  - коррелированных дефектов с эффектами случайной локальной температуры на критическое поведение неупорядоченных систем. Ренормгрупповой анализ с использованием  $\epsilon$  - разложения (Д.Е.Хмельницкий, Т.Лубенски, 1975), а затем в рамках более точного теоретико-полевого подхода (А.И.Соколов, Б.Н.Шалаев, 1981,1989; И.О.Майер, 1989; Д.В.Пахнин, А.И.Соколов, 1999) выявил, что критическое поведение неупорядоченных изингоподобных систем характеризуется новым набором критических индексов. Эксперимент (Р.Биржево и др., 1983,1988) подтвердил численное отличие статических критических индексов для неупорядоченных систем от их значений для однородных систем и показал хорошее согласие с теоретическими результатами.

Однако влияние дефектов структуры на критическую динамику значительно менее исследовано (У.Крей, Г.Гринштейн и др., 1977, Прудников В.В., 1983,1992), несмотря на ожидаемое более сильное их проявление в неравновесных характеристиках. По критической динамике разбавленных систем до сих пор существует скудная экспериментальная информация (Д.Беланджер и др.,1988). При этом достигнутая точность результатов низка для достоверной проверки результатов теоретических расчетов. Нет и достаточно обоснованных теоретических оценок динамического индекса  $z$ .

Для неупорядоченных систем остается невыясненным главный вопрос: является ли критическое поведение примесных систем универсальным, а значения критических индексов не зависящими от концентрации примесей вплоть до порога перколяции. В последнее десятилетие широкое распространение получили компьютерные методы моделирования как статического, так и динамического критического поведения различных систем, которые стали альтернативой физическим экспериментам. В результате возникла потребность



в более точных значениях критических индексов для однородных и слабо неупорядоченных систем, вычисляемых теоретически, и в проведении компьютерного моделирования критического поведения систем при изменении концентрации примесей в широком интервале.

Для неупорядоченных спиновых систем с эффектами случайных полей, несмотря на интенсивные теоретические и экспериментальные усилия, в настоящее время существует немного надежно установленных фактов об их поведении. В частности, природа фазового перехода в трехмерной модели Изинга со случайными полями все еще остается невыясненной, а получаемые при компьютерном моделировании таких систем результаты являются противоречивыми. Выявление особенностей фазовых превращений в магнетиках со случайными полями по сравнению с системами со случайной локальной температурой методами компьютерного моделирования имеет важное теоретическое и практическое значение.

### **Цель работы**

1. Развитие методики и осуществление теоретико-полевого описания критического релаксационного поведения однородных и неупорядоченных изингоподобных систем со случайно распределенными замороженными точечными  $\delta$  - коррелированными дефектами структуры в многопетловом приближении с применением методов суммирования.

2. Компьютерное моделирование процессов критической релаксации в однородных и неупорядоченных трехмерной и двумерной моделях Изинга при изменении концентрации точечных примесей в широком интервале от уровня слабого разбавления до концентраций, близких к порогу перколяции; сопоставление результатов теоретико-полевого расчета с результатами компьютерного моделирования критической динамики однородных и слабо неупорядоченных систем; выяснение вопроса об универсальности неравновесного критического поведения неупорядоченных систем.

3. Исследование особенностей фазовых превращений в магнетиках со случайными полями по сравнению с системами со случайной локальной температурой методами компьютерного моделирования неупорядоченной антиферромагнитной трехмерной модели Изинга в однородном внешнем поле. Определение природы фазового перехода в трехмерной модели Изинга со случайными полями и построение фазовой диаграммы модели при различных значениях концентрации примеси.

4. Исследование статического и динамического критического поведения неупорядоченных трехмерных систем с дальнедействующей корреляцией замороженных дефектов структуры и систем с протяженными дефектами в многопетловом приближении с применением методов суммирования.

5. Развитие методики и осуществление теоретико-полевого описания мультикритического поведения систем с двумя параметрами порядка. Исследование влияния неупорядоченности на характер фазовых диаграмм и свойства систем в окрестности мультикрити-

ческих точек.

6. Исследование фазовых превращений в пьезоэлектриках, индуцируемых системой дипольных примесных центров. Определение природы фазового перехода и структурных особенностей кристаллов за счет эффектов ливейного стрикционного взаимодействия поля поляризации и упругих деформаций. Объяснение совокупности наблюдаемых аномальных явлений в полярных полупроводниковых соединениях  $A^3B^5$  в условиях сильного легирования элементами VI группы и интенсивного комплексообразования.

#### Научная новизна результатов

1. Впервые в рамках теоретико-полевого подхода с применением методов суммирования осуществлено описание критической динамики однородных двумерных и трехмерных изинговских систем в четырехпетлевом приближении и неупорядоченных трехмерных изинговских систем с  $\delta$  - коррелированными дефектами в трехпетлевом приближении без использования  $\varepsilon$  - разложения. Вычисленные значения динамического критического индекса  $z$  для данных моделей характеризуются наивысшей точностью, достигнутой к настоящему времени в теории критических явлений.

2. Осуществлено компьютерное моделирование процессов критической релаксации намагниченности в трехмерной и двумерной неупорядоченных моделях Изинга. Впервые для описания критической динамики данных неупорядоченных систем применен метод динамической ревормгруппы и получены значения критического динамического индекса  $z$  в широком интервале изменения концентрации спинов  $p$  от слабого разбавления до сильно-неупорядоченного состояния, что позволило сформировать представление о типах универсального критического поведения неупорядоченных систем.

3. Впервые для трехмерной неупорядоченной антиферромагнитной модели Изинга с конкурирующими взаимодействиями построены фазовые диаграммы на плоскости температура - магнитное поле для нескольких значений концентраций примеси из диамагнитных атомов. Убедительно показано, что в области значений напряженности внешнего поля, характеризующейся слабыми эффектами случайных полей, переход в упорядоченную фазу осуществляется в виде фазового перехода второго рода. Впервые для данной модели выделены значения параметров, определяющих трикритическую точку для концентраций спинов  $p = 0.95; 0.8$ .

4. Впервые в рамках теоретико-полевого подхода в двухпетлевом приближении с применением метода Паде-Бореля осуществлено описание статического и динамического критического поведения неупорядоченных трехмерных систем с дальнедействующей корреляцией дефектов с различными значениями числа компонент параметра порядка  $m$  и показателя корреляции  $a$ . Полученная картина областей устойчивого критического поведения и значения критических индексов существенно отличаются от предсказанных ранее в

рамках двухпараметрического  $\varepsilon, \delta$  - разложения.

5. Впервые в рамках формализма динамического производящего функционала, развитого для описания критического поведения неупорядоченных систем, осуществлено в двухпетлевом приближении теоретико-полевое описание неравновесных свойств критического поведения модели с протяженными  $\varepsilon_d$  - мерными дефектами, случайным образом распределенных в  $d - \varepsilon_d$  направлениях.

6. Теоретико-полевое описание в двухпетлевом приближении мультикритического поведения непосредственно трехмерных систем с двумя параметрами порядка выявило существенное изменение областей различного типа устойчивого мультикритического поведения на плоскости  $(n - m)$  - числа компонент параметров порядка по сравнению с полученными ранее результатами. Показано, что это приводит к изменению типов фазовых диаграмм однородных систем во флуктуационной области. Присутствие примесей в системе приводит к флуктуационному расщеплению связи параметров порядка и осуществлению лишь единственного типа устойчивого мультикритического поведения - тетракритического.

7. Для объяснения наблюдаемых особенностей в поведении полупроводниковых соединений  $A^3B^5$  в условиях сильного легирования элементами VI группы впервые предложена феноменологическая модель фазовых превращений, индуцируемых системой дипольных примесных центров, образующихся за счет процессов комплексообразования. В основу модели положены пьезоэлектрические свойства данных кристаллов и их модификация за счет термодинамического вклада, вносимого системой дипольных центров.

**Научно-практическая значимость работы** состоит в том, что развитые в диссертации методы теоретико-полевого описания и компьютерного моделирования критического поведения однородных и неупорядоченных систем, полученные при совместном использовании данных методов результаты вносят существенный вклад в обоснование и развитие представлений теории критических явлений. Выявленное влияние дефектов структуры и эффектов их пространственной корреляции на равновесные и, в особенности, неравновесные характеристики критического поведения могут найти применение при отработке методики и постановке физических и компьютерных экспериментов, а также практическом использовании целенаправленной модификации свойств материалов, испытывающих фазовые превращения, за счет их легирования.

#### **Основные положения, выносимые на защиту**

1. Проведенное теоретико-полевое описание критической динамики однородной и слабо неупорядоченной трехмерной модели Изинга выявило, что присутствие  $\delta$  - коррелированных дефектов приводит к более сильному замедлению процессов критической релаксации по сравнению с однородными системами. Компьютерное моделирование поведения данных систем методом динамической ренормгруппы подтвердило результаты расчетов и сделав-

ные выводы.

2. Теоретико-полевое исследование показало, что корреляция дефектов приводит к проявлению влияния неупорядоченности в поведении более широкого круга систем, вызывая существенное изменение статических и динамических характеристик критического поведения. В частности, с усилением корреляции дефектов происходит замедление процессов критической релаксации в системе по сравнению с однородными системами и системами с  $\delta$ -коррелированными дефектами.

3. Результаты расчетов и компьютерного моделирования критической динамики трехмерной неупорядоченной модели Изинга позволяют выделить несколько типов универсального критического поведения: однородное; примесное I при  $p_c^{(imp)} < p < 1$  с эффектами влияния точечных примесей; примесное II при  $p_c^{(s)} < p < p_c^{(imp)}$  с эффектами влияния протяженных примесных структур; перколяционное примесное при  $p = p_c^{(imp)} = 1 - p_c^{(s)}$  и перколяционное спиновое  $p = p_c^{(s)}$ .

4. По результатам расчетов и компьютерного моделирования можно сделать вывод, что критическая динамика однородных и слабо неупорядоченных двумерных изинговских систем соответствует одному классу универсальности. Выявленная логарифмическая концентрационная зависимость динамического индекса  $z$  для сильно неупорядоченных систем с  $p \leq 0.85$  отражает проявление эффектов сингулярного динамического скейлингового поведения вблизи порога спиновой перколяции. Полученные результаты указывают на нарушение стандартной формы динамического скейлинга с  $z$ -константой, но подтверждают справедливость гипотезы обобщенного динамического скейлинга.

5. Компьютерное моделирование трехмерной антиферромагнитной модели Изинга с концентрациями спинов  $p = 0.95; 0.8$  выявило, что случайные поля, индуцированные внешним магнитным полем  $H$ , не разрушают фазового перехода из парамагнитного в антиферромагнитное состояние и для  $H < H_c(p)$  он носит характер фазового перехода второго рода, где  $H_c(p)$  - значение напряженности поля в трикритической точке. Локализация кривых фазовых переходов модели  $T_c(p, H)$  позволила выявить кроссоверные эффекты случайных полей и численные отличия критических индексов от индексов однородных систем и систем со случайными спиновыми взаимодействиями.

6. Теоретико-полевое описание мультикритического поведения систем с двумя параметрами порядка показало, что в однородных системах устойчивое бикритическое поведение возможно только для взаимодействующих одвокомпонентных параметров порядка ( $n = m = 1$ ) с критическими индексами, соответствующими изотропной ХУ-модели. Тетракритическое поведение имеет более широкую область реализации. Выделены эффекты флуктуационной неустойчивости мультикритического поведения. Присутствие точечных замороженных примесей с эффектами случайной локальной температуры перехода приво-

дит к осуществлению единственного типа устойчивого мультикритического поведения - тетракритического. В случае однокомпонентных параметров порядка ( $n = m = 1$ ) наличие примесей приводит к критическому поведению с индексами, соответствующими индексам неупорядоченной модели Изинга. Для систем с многокомпонентными параметрами порядка присутствие примесей не сказывается и мультикритическое поведение носит тетракритический характер однородной системы.

7. Показано, что при достаточно высокой концентрации дипольных примесных центров, когда линейные стрикционные взаимодействия подавляют флуктуации среднего поля диполей, фазовые превращения в пьезоэлектриках, индуцируемые системой дипольных примесных центров, имеют характер сегнетоэлектрического - сегнетоэластического фазового перехода.

**Апробация работы** Основные результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на следующих конференциях:

Международном симпозиуме по теории магнетизма (Оксфорд, 1983); XV Международной конференции по термодинамике и статистической физике (Эдинбург, 1983); XVII Всесоюзной конференции по физике магнитных явлений (Донецк, 1985); XII Всесоюзной конференции по физике сегнетоэлектриков (Ростов-на-Дону, 1989); V Всесоюзной школе-семинаре по физике сегнетоэлектриков (Ужгород, 1991); XIX Всесоюзной конференции по физике магнитных явлений (Ташкент, 1991); школах-симпозиумах "Акустика неоднородных сред" (Новосибирск, 1991, 1992); VII Всесоюзной школе-семинаре "Применение математических методов описания и изучения физико-химических равновесий" (Новосибирск, 1992); Международной конференции по электронным материалам (Новосибирск, 1992); Международном семинаре "Фазовые переходы в разбавленных системах" (Бад Хоннеф, Германия, 1995).

**Структура и объем диссертации** Диссертация состоит из введения, семи глав и заключения. Объем диссертации – 251 страница машинописного текста, в том числе 46 рисунков, 18 таблиц и список цитируемой литературы из 241 наименования.

## **Краткое содержание работы**

Во введении обоснована актуальность выбранной темы диссертационной работы и сформулированы основные цели исследований.

В первой главе, носящей обзорный характер, в краткой форме излагается содержание ряда концепций и методов, применяемых для описания критических явлений. Основное внимание уделяется вопросам динамики критических явлений и влиянию замороженных дефектов на критическое поведение систем. Выделен теоретико-полевой метод описания, позволяющий наиболее последовательно описывать эффекты аномально сильного взаимодействия флуктуаций параметра порядка в окрестности критической точки. На основе

анализа современного состояния теории критических явлений сделан ряд выводов и поставлены задачи для исследования.

Во второй главе осуществлено развитие методики и проведено теоретико-полевое описание критической релаксационной динамики однородных трехмерных и двумерных изинговских систем в четырехпетлевом приближении без использования  $\varepsilon$ -разложения. Рассматриваемая модель представляет собой классическую спиновую систему, термодинамически эквивалентную модели Гинзбурга-Ландау, с эффективным гамильтонианом

$$\mathcal{H}[\phi] = \frac{1}{2} \int d^d x \left( r_0 \phi^2 + (\nabla \phi)^2 + \frac{g_0}{12} \phi^4 \right), \quad (1)$$

где  $d$  - размерность системы;  $\phi(x, t)$  - параметр порядка, зависящий от координат и времени;  $r_0 \sim T - T_{oc}$  ( $T_{oc}$  - критическая температура, определяемая теорией среднего поля) и  $g_0 > 0$  - константа взаимодействия флуктуаций параметра порядка. Предполагается, что фурье-образ параметра порядка содержит только компоненты с волновыми векторами  $q$ , меньшими чем  $\Lambda$ .

Динамическое поведение в релаксационном режиме вблизи критической точки описывается кинетическим уравнением для параметра порядка типа уравнения Ланжевена

$$\frac{\partial \phi(x, t)}{\partial t} = -\lambda_0 \frac{\delta \mathcal{H}[\phi]}{\delta \phi(x, t)} + \zeta(x, t) + \lambda_0 h(x, t), \quad (2)$$

где  $\lambda_0$  - кинетический коэффициент;  $h(x, t)$  - внешнее магнитное поле;  $\zeta(x, t)$  - гауссова случайная сила, характеризующая влияние теплового резервуара, образованного слабо флуктуирующими степенями свободы, и задаваемая первыми моментами вида

$$\langle \zeta(x, t) \rangle = 0, \quad \langle \zeta(x, t) \zeta(x', t') \rangle = 2\lambda_0 \delta(x - x') \delta(t - t').$$

Для получения функций Грина, представляющих собой динамические корреляционные функции и функции отклика, а также соответствующих им вершинных функций был использован формализм динамического производящего функционала (Р.Бауш и др., 1976)<sup>1</sup>, развитый в диссертации для описания критической динамики в четырехпетлевом приближении. С этой целью был построен производящий функционал

$$W(J, \bar{J}) = \int \mathcal{D}\phi \mathcal{D}\bar{\phi} \exp \left( -\mathcal{L} + \int d^d x dt [J\phi + \bar{J}\bar{\phi}] \right), \quad (3)$$

где введены вспомогательное поле  $\bar{\phi}$  и источники полей  $J$  для  $\phi$  и  $\bar{J}$  для  $\bar{\phi}$ , с лагранжианом

$$\mathcal{L} = \int d^d x dt \left[ -\lambda_0^{-1} \bar{\phi}^\beta \bar{\phi}^\beta + \bar{\phi}^\beta \left( \lambda_0^{-1} \frac{\partial \phi^\beta}{\partial t} + \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \phi^\beta} \right) \right]. \quad (4)$$

Тогда функции Грина могут быть получены следующим образом

$$G^{(N, \bar{N})}(\{x, t\}_N, \{x', t'\}_{\bar{N}}) = \left\langle \prod_{j=1}^N \phi(x_j, t_j) \prod_{k=1}^{\bar{N}} \bar{\phi}(x'_k, t'_k) \right\rangle$$

<sup>1</sup>Bausch R., Janssen H.K., Wagner H. - Z. Phys. B, 1976, v.24, p.113-127.

$$= \prod_{j=1}^N \frac{\delta}{\delta J(x_j, t_j)} \prod_{k=1}^{\tilde{N}} \frac{\delta}{\delta \tilde{J}(x'_k, t'_k)} \ln W(J, \tilde{J})|_{J=\tilde{J}=0}, \quad (5)$$

а соответствующие им вершинные функции  $\Gamma^{(N, \tilde{N})}$  с помощью производящего функционала  $\Gamma(\phi, \tilde{\phi})$ , связанного с функционалом (3) преобразованием Лежандра

$$\Gamma(\phi, \tilde{\phi}) = -\ln W(J, \tilde{J}) + \int d^d x dt (J\phi + \tilde{J}\tilde{\phi}). \quad (6)$$

В рамках теоретико-полевого подхода осуществляется переход к пределу  $\Lambda \rightarrow \infty$ , что приводит к возникновению в некоторых термодинамических и кинетических величинах особенностей типа полюсов. В диссертации применяется схема размерной регуляризации, связанная с введением перенормированных величин: перенормированных полей  $\phi_R = Z^{-1/2}\phi$  и  $\tilde{\phi}_R = Z^{-1/2}\tilde{\phi}$ , перенормированных вершинных функций

$$\Gamma_R^{(N, \tilde{N})}(\mathbf{q}_i, \omega_i, r, g, \lambda, \mu) = Z^{(N+\tilde{N})/2} \Gamma^{(N, \tilde{N})}(\mathbf{q}_i, \omega_i, r_0, g_0, \lambda_0), \quad (7)$$

с перенормированными константой связи  $g$ , температурой  $r$  и кинетическим коэффициентом  $\lambda$ :  $g_0 = \mu^{4-d} Z_g g$ ,  $r_0 = \mu^2 Z_r r$ ,  $\lambda_0^{-1} = \mu^2 Z_\lambda \lambda^{-1}$ , где масштабный параметр  $\mu$  введен для обезразмеривания слагаемых в лагранжиане (4).  $Z$ -факторы определяются из требования регулярности перенормированных вершинных функций в каждом порядке теории возмущений, отраженном в условиях нормировки

$$Z \frac{\partial \Gamma^{(1,1)}(q)}{\partial q^2} \Big|_{q^2, \mu=0} = 1, \quad Z^2 \Gamma^{(3,1)} \Big|_{q_i, \mu_i=0} = \mu^{4-d} g, \quad Z \frac{\partial \Gamma^{(1,1)}(q, \omega)}{\partial (-i\omega)} \Big|_{q^2, \omega=0} = \lambda^{-1}. \quad (8)$$

Данная процедура перенормировки вершинных функций осуществлена в диссертации в рамках четырехпетлевого приближения. Асимптотическое критическое поведение систем во флуктуационной области определяется дифференциальным уравнением ренормгруппы для вершинных функций.

$$\left[ \mu \frac{\partial}{\partial \mu} + \beta \frac{\partial}{\partial g} - r \gamma_r \frac{\partial}{\partial r} + \lambda \gamma_\lambda \frac{\partial}{\partial \lambda} - \frac{N + \tilde{N}}{2} \gamma_\phi \right] \Gamma_R^{(N, \tilde{N})} = 0. \quad (9)$$

Нули скейлинговой  $\beta$ -функции определяют фиксированные точки ренормгрупповых преобразований ( $g^*(d=2) = 1,8836$ ,  $g^*(d=3) = 1,4299$ ), а значение динамической скейлинговой функции  $\gamma_\lambda$  в фиксированной точке - асимптотическое критическое поведение времени релаксации системы, характеризуемое критическим индексом  $z = 2 + \gamma(g^*)$ . В диссертации были получены выражения для  $\gamma_\lambda(g)$  в четырехпетлевом приближении:

- для двумерных систем  $\gamma_\lambda(g) = 0.027053g^2 - 0.004184g^3 + 0.022130g^4$ ,
- для трехмерных систем  $\gamma_\lambda(g) = 0.008399g^2 - 0.000045g^3 + 0.020423g^4$ .

Полученные ряды являются асимптотическими. Для их суммирования был применен метод Паде-Бореля. При использовании аппроксимантов [3/1] были получены следующие значения индекса  $z$ :

$$z^{(4)}(d=2) = 2,093, \quad z^{(4)}(d=3) = 2,017,$$

в то время как в предыдущем (3-х петлевом) приближении его значения были  $z^{(3)}(d=2) = 2,066$  и  $z^{(3)}(d=3) = 2,016$ , соответственно. Малое изменение индекса  $z$  для трехмерных систем позволяет считать, что учет поправок более высокого порядка может привести лишь к незначительным изменениям, выходящими за пределы точности эксперимента, в то время как для двумерных систем для подобного утверждения нет оснований.

Рассчитанное значение индекса  $z$  для трехмерной модели Изинга находится в хорошем соответствии с результатами физического (Д.Беланджер и др., 1988)<sup>2</sup> и большинства проведенных к настоящему времени компьютерных экспериментов в пределах их погрешности.

Сравнение рассчитанного значения индекса  $z$  для двумерной модели Изинга с результатами компьютерных экспериментов показывает, что последние дают значения индекса  $z$ , лежащие в достаточно широком интервале  $2,08 \leq z \leq 2,24$ , в то время как полученное в диссертации значение  $z^{(4)}(d=2) = 2,093$  находится на его нижней границе.

В третьей главе осуществлено обобщение метода динамического производящего функционала для описания критического поведения неупорядоченных систем и проведено теоретико-полевое описание релаксационной динамики трехмерных неупорядоченных изингоподобных систем с  $\delta$  - коррелированными дефектами структуры в трехпетлевом приближении без использования  $\epsilon$  - разложения. Рассматриваемая модель неупорядоченной системы представляет собой обобщение модели Гинзбурга-Ландау и определяется эффективным гамильтонианом

$$\mathcal{H}[\phi, V] = \int d^d x \left\{ \frac{1}{2} \sum_{\beta=1}^m \left[ r_0 (\phi^\beta)^2 + |\nabla \phi^\beta|^2 + V(x) (\phi^\beta)^2 \right] + \frac{g_0}{4!} \left( \sum_{\beta=1}^m (\phi^\beta)^2 \right)^2 \right\}, \quad (10)$$

где  $\phi^\beta(x, t)$  -  $m$  - компонентный параметр порядка;  $V(x)$  - потенциал случайного поля дефектов, приводящий к флуктуациям локальной температуры перехода. Пространственное распределение дефектов зададим следующими первыми моментами

$$\langle\langle V(x) \rangle\rangle = 0, \quad \langle\langle V(x)V(y) \rangle\rangle = 8g(x-y) = 8\delta_0 \delta^d(x-y). \quad (11)$$

Динамическое поведение неупорядоченных систем в релаксационном режиме в окрестности критической точки может быть описано с помощью уравнения Ланжевена (2) для параметра порядка. Формализм динамического производящего функционала, впервые обобщенный на случай неупорядоченных систем в работе (И.Лери, В.В.Прудников, 1984), был применен в данной главе к системам с  $\delta$  - коррелированными дефектами и развит на случай

<sup>2</sup>Belanger D.P., et.al. - J. de Physique Collque C8, 1988, v.49, N 7, p.1229-1238.



многопетлевого приближения. При этом репличный лагранжиан имеет вид

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^{(n)} = & \sum_i \int d^d x dt \left[ -\lambda_0^{-1} \tilde{\phi}_i^\beta \tilde{\phi}_i^\beta + \tilde{\phi}_i^\beta \left( \lambda_0^{-1} \frac{\partial \phi_i^\beta}{\partial t} - \nabla^2 \phi_i^\beta + r_0 \phi_i^\beta \right) + \frac{1}{3!} g_0 \tilde{\phi}_i^\beta \phi_i^\beta \phi_i^\beta \right] \\ & - 4 \sum_{ij} \int d^d x d^d y dt dt' g(x-y) \tilde{\phi}_i^\beta(x, t) \phi_i^\beta(x, t) \tilde{\phi}_j^\gamma(y, t') \phi_j^\gamma(y, t'), \end{aligned} \quad (12)$$

где введены  $n$  - реплик ("образов") исходного поля  $\phi - \{\phi_i\}$  с репличными индексами  $i = 1, \dots, n$ . Проведенная процедура перенормировки полей и параметров лагранжиана позволила определить скейлинговые  $\beta$  - и  $\gamma$  - функции в трехпетлевом приближении. В частности, для динамической скейлинговой функции  $\gamma_\lambda$  неупорядоченной трехмерной модели Изинга было получено следующее выражение

$$\begin{aligned} \gamma_\lambda = & -0,25u + 0,053240u^2 + 0,30862uv + 0,0084v^2 - 0,049995u^3 - 0,152964u^2v \\ & - 0,044167uv^2 - 0,012642v^3, \end{aligned}$$

где  $v$  и  $u$  - перенормированные константы связи, соответствующие  $g_0$  и  $\delta_0$ . Применение метода суммирования Чисхолма-Бореля к  $\beta$  и  $\gamma$  - функциям позволило определить значения фиксированных точек  $v^* = 2,2569$ ,  $u^* = -0,7282$  и динамического критического индекса  $z^{(3)} = 2,165$ . Применение метода Паде-Бореля, обобщенного на двухпараметрический случай, дало следующие результаты:  $v^* = 2,2361$ ,  $u^* = -0,6839$  и  $z^{(3)} = 2,174$ . Сопоставление усредненного значения индекса  $z = 2,170 \pm 0,005$  со значением, получающимся в двухпетлевом приближении  $z_{\text{дв}}^{(2)} = 2,1698$ , позволяет считать, что учет поправок более высокого порядка может привести лишь к незначительным изменениям. В то же время, результаты применения  $\epsilon$  - разложения (Х.Джансен и др., 1995)<sup>3</sup> дают неадекватные значения индекса  $z$  с большими изменениями в значениях при переходе от первого порядка по  $\sqrt{\epsilon}$  ко второму. Полученные в диссертации значения динамического критического индекса убедительно доказывают существенность влияния дефектов на критическую динамику трехмерных изинговских систем, приводящих к еще более сильному замедлению процессов критической релаксации.

В четвертой главе осуществлено компьютерное моделирование процессов критической релаксации намагниченности в трехмерной и двумерной неупорядоченных моделях Изинга, а также моделирование фазовых превращений в трехмерной неупорядоченной антиферромагнитной модели Изинга во внешнем поле, характеризующейся эффектами случайных полей.

Неупорядоченная ферромагнитная модель Изинга задавалась как система спинов  $S_i = \pm 1$  с концентрацией  $p$ , связанных с  $N = pL^d$  ( $L$  - линейный размер системы) узлами простой кубической ( $d = 3$ ) или квадратной ( $d = 2$ ) решетки с периодическими

<sup>3</sup>Janssen H.K., Oerding K., Sengespick E. - J.Phys. A, 1995, v.28, N21, p.6073-6085.

граничными условиями. Это дает  $2^N$  возможных конфигураций  $\{S\}$  с энергией

$$E = -J \sum_{i,j} p_i p_j S_i S_j, \quad (13)$$

где суммирование осуществляется по ближайшим парам спинов,  $J > 0$  характеризует энергию их взаимодействия,  $p_i$  - случайные переменные, описываемые функцией распределения  $P(p_i) = p\delta(p_i - 1) + (1 - p)\delta(p_i)$  и характеризующие распределенные по узлам решетки замороженные немагнитные атомы примеси (пустые узлы). Для определения динамического индекса  $z$  был применен метод Монте - Карло для одвоспиновой динамики совместно с методом динамической ренорм-группы (Н.Джан и др., 1984)<sup>4</sup>, впервые обобщенным на случай моделирования неупорядоченных систем в работах (А.Н.Вакилов, В.В.Прудников, 1992; О.Н.Марков, В.В.Прудников, 1994). Осуществлялась процедура блочного разбиения системы, когда блок  $b^d$  соседних спинов заменялся одним спином с направлением, определяемым направлением большинства спинов в блоке. Переопределенная система спинов образует новую решетку с намагнитченностью  $m_b$ . Использование двух систем после блочного разбиения с размерами блоков  $b$  и  $b'$  и определение промежутков времени  $t_b$  и  $t_{b'}$ , по истечении которых их намагнитченности  $m_b$  и  $m_{b'}$  достигнут одного и того же значения  $m_1$ , позволяет определить динамический индекс  $z$  из соотношения

$$t_b/t_{b'} = (b/b')^z \quad \text{или} \quad z = \ln(t_b/t_{b'})/\ln(b/b') \quad (14)$$

в пределе достаточно больших  $b$  и  $b' \rightarrow \infty$ . Этот алгоритм был применен в первом параграфе главы к однородной и неупорядоченной трехмерной модели Изинга с размером решетки  $L = 48$  и концентрациями спинов  $p = 1.0; 0.95; 0.8; 0.6; 0.4$ . Размер системы позволял осуществить разбиение на блоки с размерами  $b = 2, 3, 4, 6, 8, 12$ . При этом блок с размерами  $b^d$  считался спиновым и заменялся эффективным спином с направлением, определяемым направлением большинства спинов в блоке, если в нем осуществлялось спиновое протекание, или примесью в противном случае. Для каждой из систем осуществлялась процедура моделирования релаксации из 1000 шагов Монте-Карло на спин при 10-15 различных конфигурациях примесей. Для каждой примесной конфигурации осуществлялось 20 - 30 прогонов и по полученным результатам проводилось усреднение зависимостей  $m_b(t)$ .

На основе соотношений (14) были получены наборы значений индекса  $z_b$ , соответствующих различным  $b$ . Выделенная зависимость  $z$  от  $b$  позволила осуществить процедуру экстраполяции на случай  $b \rightarrow \infty$ , предполагая, что  $z_b = z_{b=\infty} + \text{const} \cdot b^{-1}$ . В результате получены следующие значения  $z(p)$  для однородной и примесных систем:  $z(1.0) = 1.97 \pm 0.08$ ,  $z(0.95) = 2.19 \pm 0.07$ ,  $z(0.8) = 2.20 \pm 0.08$ ,  $z(0.6) = 2.58 \pm 0.09$ ,  $z(0.4) = 2.65 \pm 0.12$ . Отсюда видно, что значения динамического индекса для  $p = 0.95$  и  $p = 0.8$  практически совпадают,

<sup>4</sup>Jan N., Moseley L.L., Stauffer D. - J. Stat. Phys., 1983, v.33, N1, p.1-11.

а для  $p = 0.6$  и  $p = 0.4$  сопоставимы в пределах погрешности их определения. С учетом индекса  $z$  для однородной системы полученные значения условно могут быть разделены на три группы, значительно отличающиеся по величине. Сопоставление теоретических результатов с результатами моделирования показывает их хорошее согласие для однородной системы и примесной системы с  $p = 0.95$  и  $p = 0.8$ . Для  $p = 0.6$  и  $p = 0.4$  результаты моделирования демонстрируют существенное увеличение динамического индекса  $z$ . Это можно объяснить тем, что для кубической решетки изинговских спинов при  $p \leq p_c^{(imp)} \simeq 0.69$  примеси образуют связывающий кластер, который для  $T \leq T_c$  сосуществует со спиновым связывающим кластером вплоть до порога спиновой перколяции  $p_c = 1 - p_c^{(imp)}$ . В результате, возникает фракталоподобная структура с эффективной далекодействующей пространственной корреляцией в распределении примесей и модель Изинга в области  $p_c \leq p \leq p_c^{(imp)}$  характеризуется новым типом критического поведения, определяемым протяженными примесными структурами. В соответствии с результатами диссертации динамический индекс  $z$  для модели Изинга с протяженными примесными структурами принимает более высокие значения, чем в случае модели Изинга с  $\delta$ -коррелированными примесями. В работе предлагается гипотеза ступенчатой универсальности поведения трехмерных разбавленных магнетиков (для двумерных таких эффектов не возникает, т.к.  $p_c > 0.5$ ), согласно которой в области разбавления  $p \geq p_c$  могут наблюдаться пять типов различного критического поведения: однородное; примесное I при  $p_c^{(imp)} < p < 1$  с эффектами влияния точечных примесей; примесное II при  $p_c < p < p_c^{(imp)}$  с эффектами влияния протяженной примесной структуры; перколяционное примесное при  $p = p_c^{(imp)}$  и перколяционное спиновое при  $p = p_c$ .

**Во втором параграфе** главы представлены результаты по компьютерному моделированию критической релаксации двумерной модели Изинга на квадратной решетке с  $L = 400$  и концентрациями спинов  $p = 1.0; 0.95; 0.9; 0.85; 0.8; 0.75; 0.7$ . Данное исследование впервые проведено в столь широком интервале изменения концентрации примеси. Для определения динамического индекса  $z$  был применен ревормгрупповой метод Монте-Карло описания односпиновой динамики. Размер системы позволял осуществить разбиение на блоки с размерами  $b = 2, 4, 5, 8, 10, 16, 20, 25, 40$ . Для систем с  $p \geq 0.9$  осуществлялась процедура моделирования релаксации из 1000 шагов Монте-Карло на спин при 10-20 различных конфигурациях примесей. Для каждой примесной конфигурации осуществлялось 10-15 прогонов и по полученным результатам проводилось усреднение зависимостей  $m_b(t)$ . Для систем с  $p = 0.85, 0.8, 0.75, 0.7$  процедура моделирования релаксации состояла соответственно из 2000, 4000, 8000, 16000 шагов Монте-Карло на спин при 10-15 прогонах и использовании 30 различных конфигураций примесей. Больше, по сравнению с системами с  $p \geq 0.9$ , количество примесных конфигураций, используемых для усреднения зависимостей  $m_b(t)$ , обусловлено ростом флуктуаций в распределении примесей по решетке по мере

приближения к порогу перколяции. Были получены следующие экстраполированные значения  $z(p)$ :  $z(1.0) = 2.24 \pm 0.07$ ,  $z(0.95) = 2.24 \pm 0.06$ ,  $z(0.9) = 2.24 \pm 0.06$ ,  $z(0.85) = 2.38 \pm 0.05$ ,  $z(0.8) = 2.51 \pm 0.06$ ,  $z(0.75) = 2.66 \pm 0.07$ ,  $z(0.7) = 2.88 \pm 0.06$ .

Анализ полученных значений индекса  $z(p)$  показывает, что для концентраций  $p \geq 0.9$  критическая динамика неупорядоченной двумерной модели Изинга и однородной модели принадлежат к одному классу универсальности с индексом  $z = 2.24 \pm 0.07$ . Результаты других авторов по компьютерному моделированию динамики однородной двумерной модели Изинга дают значения индекса  $z$ , лежащие в широком интервале  $2.08 \leq z \leq 2.24$ . Столь широкий разброс полученных значений индекса  $z$  может быть связан с тем, что в отличие от трехмерной двумерная модель Изинга характеризуется более развитыми флуктуациями намагниченности и поэтому все трудности как аналитического, так и компьютерного описания критического поведения в двумерной модели более ярко проявляются.

Для систем с концентрациями спинов  $p \leq 0.85$  было обнаружено увеличение индекса  $z$  по мере уменьшения  $p$ . Данные изменения  $z(p)$  могут быть интерпретированы как результат проявления кроссоверных эффектов перколяционного поведения. В ряде работ (С.Хевли, 1985; С.Харрис, Р.Стивчюмб, 1986)<sup>56</sup> были высказаны идеи нарушения при перколяционной концентрации спинов стандартной формы динамического скейлинга  $\ln \tau = f(\ln \xi_T)$ , где  $\tau$  - время релаксации,  $\xi_T$  - корреляционная длина,  $f(x)$  является обобщенной однородной функцией своего аргумента  $x$ . Для большинства изученных к настоящему времени критических явлений время релаксации систем удовлетворяло данному соотношению с функцией  $f(x) = zx$  и универсальным динамическим индексом  $z$ . Предполагается, что при  $p \simeq p_c$  реализуется сингулярное динамическое скейлинговое поведение с  $f(x) = Ax^2 + Bx + C$ . При этом может быть введен зависящий от температуры эффективный динамический индекс  $z(\tau \sim \xi^z)$  в виде  $z = A \ln \xi_T + B$  с  $z \rightarrow \infty$  при  $\xi_T \rightarrow \infty$  ( $T \rightarrow 0$ ,  $p = p_c$ ). По результатам моделирования в диссертации выявлено, что зависимость индекса  $z$  от  $p$  для  $p = 0.7, 0.75, 0.8, 0.85$  хорошо описывается логарифмической функцией  $z = A' |\ln(p - p_c)| + B'$  с  $A' = 0.56 \pm 0.07$ ,  $B' = 1.62 \pm 0.07$ . Данная зависимость может быть сопоставлена с аномальной скейлинговой зависимостью для эффективного динамического индекса  $z$  при  $\xi_T \cong \xi_p = \xi_0(p - p_c)^{-\nu_p}$  и  $A' = A\nu_p$ ,  $B' = B + A \ln \xi_0$ , где  $\nu_p$  - индекс корреляционной длины  $\xi_p$  для явления перколяции. Равенство  $\xi_T \cong \xi_p$  соответствует условиям проводимого компьютерного эксперимента при  $T = T_c(p)$  и  $p$ , близких к  $p_c \simeq 0.59$ .

Таким образом, в диссертации получено подтверждение сингулярного динамического скейлингового поведения вблизи порога перколяции, эффекты которого начинают проявляться для двумерной модели Изинга при концентрациях спинов  $p \leq 0.85$ . В данном

<sup>56</sup>Healey C.K. - Phys.Rev.Lett., 1985, v.54, N 18, p.2030-2033.

<sup>56</sup>Harris C.K., Stinchcombe R.B. - Phys. Rev. Lett., 1986, v.56, N8, p.869-872.

явлении нашло свое отражение общее свойство динамического поведения примесных систем в длинноволновом пределе, которое в отличие от статического характеризуется другими локальными законами сохранения в рассеянии спиновых флуктуаций на примесях. В результате в критической динамике присутствие примесей сказывается сильнее, чем при описании равновесных свойств.

В третьем параграфе главы с целью выявления особенностей фазовых превращений в магнетиках со случайными полями по сравнению с системами со случайной локальной температурой перехода было осуществлено компьютерное моделирование методом Монте-Карло критического поведения неупорядоченной антиферромагнитной модели Изинга на простой кубической решетке с гамильтонианом вида

$$\mathcal{H} = J_1 \sum_{i,j} p_i p_j \sigma_i \sigma_j + J_2 \sum_{i,k} p_i p_k \sigma_i \sigma_k + \mu H \sum_i \sigma_i, \quad (15)$$

где  $J_1 = 1$  характеризует антиферромагнитное взаимодействие ближайших спинов, а  $J_2 = -1/2$  - ферромагнитное взаимодействие спинов, следующих за ближайшими;  $H$  - напряженность однородного магнитного поля;  $p_i, p_j$  - случайные переменные. При  $p = 1, 0$  данная модель с конкурирующими взаимодействиями уже более двадцати лет исследуется методами Монте-Карло (Д.Ландау, 1972)<sup>7</sup>. Однако для описания влияния неупорядоченности на критическое поведение она применена нами впервые. С физической точки зрения данная модель является наиболее реалистичной. Случайные поля в модели, как и в реальных магнитных системах, определяются концентрацией примесей и величиной внешнего поля. Поэтому параметры модели однозначно сопоставляются с параметрами физического эксперимента.

Были рассмотрены кубические решетки с размерами  $L = 12, 18, 24, 32$  с концентрацией спинов  $p = 1, 0; 0,95; 0,8$ . Результаты по компьютерному моделированию модели имеют приоритетное значение. Впервые построены фазовые диаграммы модели (рис.1) при концентрациях спинов  $p = 0,95, 0,8$ . Убедительно показано, что в области слабых внешних полей эффекты случайных полей не разрушают фазового перехода 2-го рода. Для локализации критических температур вдоль кривой фазового перехода применен метод кумулянтов Биндера, позволяющий на основе скейлингового анализа не только с высокой точностью провести определение температуры перехода 2-го рода, но и тестировать характер фазового перехода. Впервые осуществлялась локализация трикритических точек на фазовых диаграммах рассмотренных неупорядоченных систем на основе анализа гистерезисных эффектов в поведении намагниченности.

Полученная функциональная зависимость  $T_c(p, H)$  позволила выявить кроссоверные эффекты влияния случайных полей на критическое поведение магнетика, полагая

<sup>7</sup>Landau D.P. - Phys.Rev.Lett.,1972, v.28,N7, p.449-452.

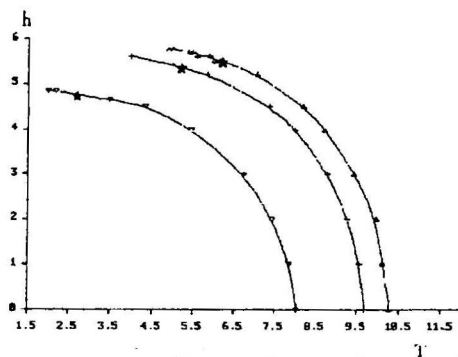


Рис. 1: Фазовая диаграмма антиферромагнитной модели Изинга:  $\Delta$  —  $p = 1.0$  (однородная),  $+$  —  $p = 0.95$ ,  $\nabla$  —  $p = 0.8$ ,  $*$  — трикритические точки.

$T_c(p, H) = T_c(p, 0)[1 - aH^2 + bH^{2/\phi^{(r)}}]$ . Было показано, что в пределах 2-процентной точности справедлива среднеполевая зависимость  $T_c(p, 0) \simeq pT_c(1, 0)$ , а аппроксимация  $T_c(p, H)$  для  $H \leq 4$  приведенной выше зависимостью дает значения индекса кроссовера для случайных полей  $\phi \simeq 0.86(5)$  для  $p = 0.95$  и  $\phi \simeq 0.92(6)$  для  $p = 0.8$ . Вблизи трикритических точек аппроксимация  $T_c(p, H)$  зависимостью  $T_c(p, H) = T_c(p, 0)[1 - a_+H^{2/\phi_+} + bH^{2/\phi_+^{(r)}}]$  позволила определить значение трикритического индекса кроссовера для однородной системы  $\phi_+ \simeq 0.54(5)$ , которое находится в соответствии с классическим среднеполевым значением  $\phi_+ = 1/2$ , и неупорядоченных систем  $\phi_+^{(r)} = 0.61(6)$  при  $p = 0.95$  и  $\phi_+^{(r)} = 0.67(7)$  при  $p = 0.8$ , которые указывают на то, что неупорядоченность системы определяет трикритическое поведение с неклассическими трикритическими индексами.

На основе анализа асимптотической скейлинговой зависимости для кумулянтов и "шахматной" восприимчивости при критических температурах  $T_c(p, H)$  были определены критические индексы  $\nu$  и  $\gamma$  для однородных и неупорядоченных состояний антиферромагнитной модели Изинга. Определены отличающиеся по значениям критические индексы для однородной модели, неупорядоченной модели с эффектами случайной температуры ( $H = 0$ ) и эффектами случайных полей при  $H = 1$ . Выявлено увеличение значений индексов  $\nu$  и  $\gamma$  с ростом неупорядоченности системы.

В пятой главе в рамках формализма динамического производящего функционала, развитого в диссертации для описания критического поведения неупорядоченных систем, осуществлено теоретико-полевое описание статических и динамических свойств критического поведения модели Дороговцева<sup>8</sup> с протяженными  $\epsilon_d$ -мерными дефектами, случайным

<sup>8</sup>Дороговцев С.Н. - ФТТ, 1980, т.22, N2, с.321-327; N12, с.3658-3664.

образом распределенных в  $d - \epsilon_d$  направлениях, а также систем с дальнедействующей корреляцией дефектов на основе модели Вейнриба-Гальперина<sup>9</sup> непосредственно для трехмерных систем и различных численных значений параметра корреляции  $a$ .

В первом параграфе главы представлен ренормгрупповой анализ модели с протяженными дефектами. Модель характеризуется гамильтонианом типа (10) с корреляционной функцией для потенциала поля дефектов (11), задаваемой выражением  $g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \sim \delta^{d-\epsilon_d}(\mathbf{x}_\perp - \mathbf{y}_\perp)$ . Величины  $\epsilon$  и  $\epsilon_d$  были использованы в качестве малых параметров. Система с протяженными дефектами является анизотропной, поэтому ее критическое поведение характеризуется набором как статических  $\eta_\parallel, \nu_\parallel, \eta_\perp, \nu_\perp$ , так и динамических индексов  $z_\parallel$  и  $z_\perp$ , определяющих поведение корреляционных функций параметра порядка и динамических функций отклика вдоль направлений, параллельных и перпендикулярных  $\epsilon_d$ -мерным гиперплоскостям дефектов. Этим наборам индексов сопоставляется расширенное множество скейлинговых соотношений. В диссертации осуществлен расчет статических и динамических критических индексов модели в двухпетлевом приближении. Показано, что нелокальный характер взаимодействия флуктуаций параметра порядка через поле протяженных дефектов и возникающая анизотропия системы существенно изменяют динамическое критическое поведение модели. В результате оно характеризуется динамическими индексами  $z_\parallel$  и  $z_\perp$ , значения которых отличаются от значений  $z$  для системы с  $\delta$ -коррелированными дефектами ( $\epsilon_d = 0$ ). Показано, что хотя ренормгрупповые функции и зависят от отношения  $\epsilon/(\epsilon + \epsilon_d)$ , выражения для критических индексов не содержат данного отношения. Применение методов суммирования позволило оценить значения критических индексов при  $\epsilon = \epsilon_d = 1$ , соответствующих системе линейных дислокаций в трехмерных кристаллах. Полученные значения критических индексов для различных значений числа компонент параметра порядка  $m$  существенно отличаются от соответствующих индексов однородных систем и наглядно демонстрируют, что неупорядоченность системы с протяженными дефектами проявляется в значительно более широком диапазоне значений  $m$ , чем в случае  $\delta$ -коррелированных дефектов.

Во втором параграфе главы проведено теоретико-полевое описание критического поведения систем с изотропной дальнедействующей корреляцией пространственного распределения дефектов. Модель также характеризуется гамильтонианом типа (10) с корреляционной функцией для потенциала поля дефектов (11), задаваемой выражением  $g(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \sim |\mathbf{x} - \mathbf{y}|^{-a}$ . При этом, фурье-образ вершины  $g(\mathbf{x} - \mathbf{y})$  в репличном лагранжиане (12) имеет для данной модели при малых волновых векторах  $k$  следующий вид  $g(k) = v_0 + w_0 k^{a-d}$ . Из положительной определенности  $g(k)$  непосредственно следует, что для  $a > d$  вклад слагаемого с  $w_0 \neq 0$  несущественен, поэтому  $v_0 \geq 0$ , а  $\mathcal{L}^{(n)}$  соответствует модели с  $\delta$ -корре-

<sup>9</sup>Weinrib A., Halperin B.I. - Phys. Rev. B, 1983, v.27, p.413-427.

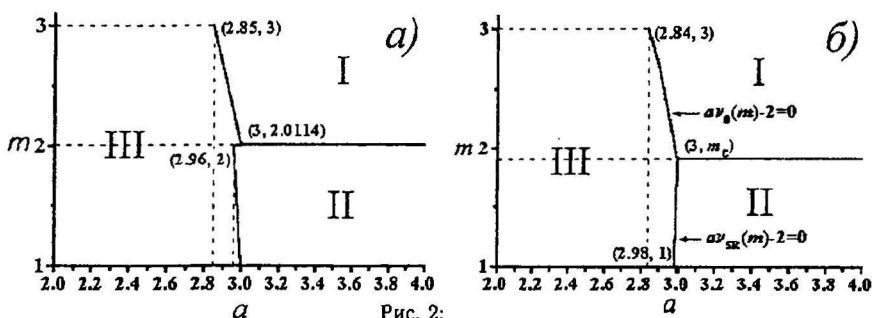


Рис. 2:

лированными дефектами. Для  $a < d$  зависимость  $g(k)$  определяется прежде всего вторым слагаемым, пропорциональным  $w_0$ , поэтому  $w_0 \geq 0$ .

Теоретико-полевое описание модели в двухпетлевом приближении и расчет соответствующих диаграмм Фейнмана, дающих вклад в двух- и четырехточечные вершинные функции, непосредственно при  $d = 3$  и численных значениях параметра корреляции  $2 \leq a \leq 3$ , проведенный с шагом  $\Delta a = 0,01$ , позволили определить скейлинговые  $\beta$ - и  $\gamma$ -функции в виде рядов по перенормированным константам связи  $u, v, w$ . С применением обобщенного на трехпараметрический случай метода Паде-Бореля были определены фиксированные точки модели и условия их устойчивости. Было выделено три типа фиксированных точек в представляющей физический интерес области значений параметров лагранжиана: I - соответствует критическому поведению однородной системы ( $u^* \neq 0, v^*, w^* = 0$ ), II - системы с  $\delta$ -коррелированными дефектами ( $u^*, v^* \neq 0, w^* = 0$ ) и III - системы с дальноточечной корреляцией дефектов ( $u^*, v^*, w^* \neq 0$ ). Анализ устойчивости фиксированных точек позволил определить области существования различных типов критического поведения на плоскости  $(a, m)$ , где  $m$  - число компонент параметра порядка (рис.2а). Картина областей устойчивого критического поведения существенно отличается от полученной ранее в рамках  $\epsilon, \delta$ -разложения. В диссертации предсказаны возможные изменения областей критического поведения в более высоких порядках теории (рис.2б).

Для различных  $m$  и  $2 \leq a \leq 3$  вычислены значения критических индексов. Выявлено нарушение полагавшегося до сих пор точным соотношения  $\nu = 2/a$ . Полученные значения индексов существенно отличаются от предсказываемых в рамках метода  $\epsilon, \delta$ -разложения. Вычисленные в диссертации значения динамического индекса  $z$  демонстрируют, что с увеличением пространственной корреляции дефектов (уменьшением параметра  $a$ ) происходит значительное замедление процессов критической релаксации в системе по сравнению с однородными системами и системами с  $\delta$ -коррелированными дефектами.



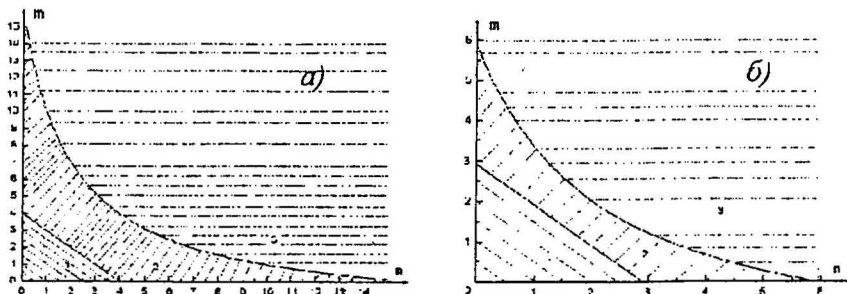


Рис. 3: Области устойчивости фиксированных точек, определенные в первом порядке  $\epsilon$ -разложения (а) и в рамках теоретико-полевого подхода в двухпетлевом приближении при  $d = 3$  (б).

Полученные значения критических индексов могут быть использованы для интерпретации представленных в четвертой главе диссертации результатов компьютерного моделирования критической динамики сильно неупорядоченной трехмерной модели Изинга.

Выявленное существенное влияние эффектов корреляции дефектов на критическое поведение неупорядоченных систем может быть зафиксировано в экспериментальных исследованиях реальных неупорядоченных систем с эффектами дальнего действия, таких как ориентационные стекла и тела с дефектами фракталоподобного типа, а также при компьютерном моделировании критического поведения систем со случайно ориентированными линейными дефектами ( $a = 2$ ).

Изложению методики и результатов теоретико-полевого описания мультикритического поведения однородных и неупорядоченных систем с двумя параметрами порядка посвящена шестая глава.

Проведенное в двухпетлевом приближении описание критического поведения непосредственно трехмерных систем выявило существенное изменение областей различного типа устойчивого мультикритического поведения на плоскости  $(n - m)$  - числа компонент для двух параметров порядка, по сравнению с полученными ранее результатами (рис.3). Показано, что устойчивое мультикритическое поведение, соответствующее изотропной фиксированной точке 1 с флуктуационно индуцированной асимптотической симметрией системы  $SO(n + m)$ , возможно только для  $n + m < 2.9088$ , т.е. наивысшей асимптотической симметрией системы является  $SO(2)$ . Значительное изменение претерпели области стабильности и остальных двух типов фиксированных точек 2 (с симметрией  $SO(n) \times SO(m)$ ) и 3 (с симметрией  $SO(n) \oplus SO(m)$ ), соответствующих устойчивому тетракритическому поведению. Показано, что изменение областей стабильности фиксированных точек приводит к заметному изменению типов фазовых диаграмм систем во флуктуационной области. Устойчивое бикритическое поведение предсказывается в диссертации только для взаимодействующих

однокомпонентных параметров порядка ( $n = m = 1$ ) с критическими индексами, соответствующими изотропной ХУ-модели. Тетракритическое же поведение должно иметь более широкую реализацию среди систем с многокомпонентными параметрами порядка. Обсуждены эффекты флуктуационной неустойчивости мультикритического поведения.

Исследование влияния точечных замороженных примесей, создающих в системах с двумя параметрами порядка флуктуации случайной локальной температуры, на характер фиксированных точек и их устойчивость показало, что присутствие примесей в системе приводит к флуктуационному расщеплению связи параметров порядка и осуществлению лишь единственного типа устойчивого мультикритического поведения - тетракритического с общей симметрией системы  $SO(n) \oplus SO(m)$ . В случае однокомпонентных параметров порядка ( $n = m = 1$ ) наличие примесей существенно и приводит к критическому поведению с индексами, соответствующими индексам неупорядоченной модели Изинга. Для систем с многокомпонентными параметрами порядка присутствие примесей не сказывается и мультикритическое поведение носит тетракритический характер однородной системы. Присутствие примесей приводит к существенному сокращению по сравнению с однородными системами возможных типов фазовых диаграмм. Принципиальный момент изменения связан с невозможностью реализации в неупорядоченных системах фазовой диаграммы, содержащей бикритическую точку.

В седьмой главе для объяснения наблюдаемых особенностей в поведении полярных полупроводниковых соединений  $A^3B^5$  в условиях сильного легирования элементами VI группы предложена феноменологическая модель фазовых превращений, индуцируемых системой дипольных примесных центров, образующихся в данных соединениях за счет процессов комплексообразования атомов примеси с собственными дефектами структуры. В основу модели положены пьезоэлектрические свойства данных кристаллов, задающие линейное стрикционное взаимодействие упругих деформаций кристалла с полем поляризации, и их модификация за счет термодинамического вклада, вносимого системой дипольных центров. В рамках приближения самосогласованного поля показано, что фазовые превращения в пьезоэлектриках, индуцируемые системой дипольных центров, имеют характер сегнетоэлектрического - сегнетоэластического фазового перехода. Возможность такого подхода обосновывается тем, что при достаточно высокой концентрации дипольных примесных центров линейные стрикционные взаимодействия подавляют флуктуации среднего поля диполей, которые могли бы разрушить сегнетоэлектрическое упорядочение.

Рассмотрены условия реализации сегнетоэлектрического - сегнетоэластического фазового перехода в системе с дипольными примесными центрами при их концентрации  $N_d$  выше некоторой пороговой концентрации  $N_c$ , когда возросшая величина стрикционного взаимодействия не только подавляет флуктуации среднего поля диполей, но и практически пол-

ностью определяет величину температуры фазового перехода. Предсказывается, что при  $N_d$  ниже пороговой концентрации  $N_c$  взаимодействие дипольных примесных центров окажется малым настолько, что уменьшившаяся величина стрикционного взаимодействия окажется не в состоянии ограничить влияние флуктуационных эффектов. В результате произойдет разрушение дальнего упорядочения.

Расчет изменения упругих модулей кристалла при легировании выявил структурную неустойчивость системы относительно поперечных акустических мод, что нашло отражение в особенностях концентрационного и температурного поведения скорости ультразвука в образцах. Предсказываемое моделью увеличение пьезомодуля кристалла с ростом концентрации дипольных центров ранее было выявлено при анализе результатов поглощения ИК излучения свободными носителями заряда в арсениде галлия, легированном элементами VI группы. Построенная теоретическая модель фазовых превращений позволяет не только объяснить накопленный экспериментальный материал, но и предсказывает возможность образования крупномасштабной сверхструктуры в сильно легированных элементами VI группы образцах полупроводниковых соединений  $A^3B^5$  в окрестности сегнетоэлектрического - сегнетоэластического фазового перехода.

В заключении сформулированы основные результаты и выводы диссертации.

## Основные результаты и выводы

1. В рамках единого подхода, основанного на формализме динамического производящего функционала для корреляционных функций и функций отклика, осуществлено теоретико-полевое описание критической динамики однородных и неупорядоченных систем с  $\delta$  - коррелированными дефектами и дефектами с дальнедействующей пространственной корреляцией.

2. Осуществлено развитие методики и проведено теоретико-полевое описание критической релаксационной динамики однородных трехмерных и двумерных изингоподобных спиновых систем в четырехпетлевом приближении без использования  $\epsilon$  - разложения. С использованием метода Паде-Бореля вычислены значения динамического критического индекса: для трехмерных систем  $z^{(4)} = 2,017$ , для двумерных систем  $z^{(4)} = 2,093$ . Сделав вывод, что учет поправок более высокого порядка может привести лишь к незначительным изменениям полученного значения индекса для трехмерных систем  $z$ , не превышающим 0,001. Для достижения подобной точности индекса  $z$  для двумерной системы необходимы более высокие порядки приближения теории из-за значительно более развитых флуктуаций.

3. Осуществлено обобщение метода динамического производящего функционала для описания критического поведения неупорядоченных систем и проведено теоретико-полевое описание релаксационной динамики трехмерных неупорядоченных изингоподобных систем

с  $\delta$  - коррелированными дефектами в трехпетлевом приближении без использования  $\epsilon$  - разложения. С использованием методов суммирования получены значения динамического критического индекса со средним значением  $z = 2,170 \pm 0,005$ . Сделан вывод, что учет поправок более высокого порядка может привести лишь к незначительным изменениям.

4. Сопоставление полученных в диссертации значений динамических критических индексов для однородных и неупорядоченных систем убедительно доказывает существенность влияния на критическую динамику трехмерных изингоподобных систем дефектов структуры, приводящих к еще более сильному замедлению процессов критической релаксации.

5. Компьютерное моделирование процессов критической релаксации в трехмерной и двумерной неупорядоченных моделях Изинга методом динамической ренормгруппы позволило получить значения критического динамического индекса  $z$  в широком интервале изменения концентрации спинов  $p$  от слабого разбавления до сильно неупорядоченного состояния.

Для однородной и слабо неупорядоченной трехмерной модели Изинга с концентрациями спинов  $p \geq 0.8$  результаты моделирования находятся в хорошем согласии с результатами теоретико-полевого расчета. Сделан вывод, что критическая динамика слабо неупорядоченной трехмерной модели Изинга принадлежит к одному классу универсальности.

Значения индекса  $z$  для слабо неупорядоченной двумерной модели Изинга с  $p \geq 0.9$  совпадают в пределах погрешности со значением индекса  $z$  для однородной модели, но оказываются завышенными по сравнению с рассчитанным в четырехпетлевом приближении. Эти численные различия связываются с влиянием на процессы критической релаксации двумерной модели более развитых равновесных флуктуаций намагниченности по сравнению с трехмерной моделью. Сделан вывод, что критическая динамика однородной и слабо неупорядоченных двумерных изинговских систем принадлежит к одному классу универсальности.

6. Для сильно неупорядоченных систем с концентрацией спинов  $p \leq 0.6$  для трехмерной модели Изинга и  $p \leq 0.85$  для двумерной модели результаты компьютерного моделирования демонстрируют существенное увеличение критического динамического индекса  $z$  по сравнению со слабо неупорядоченными системами.

Результаты расчетов и компьютерного моделирования критической динамики трехмерной неупорядоченной модели Изинга позволяют выделить несколько типов универсального критического поведения: однородное; примесное I при  $p_c^{(imp)} < p < 1$  с эффектами влияния точечных примесей; примесное II при  $p_c^{(s)} < p < p_c^{(imp)}$  с эффектами влияния протяженных примесных структур; перколяционное примесное при  $p = p_c^{(imp)}$  и перколяционное спиновое  $p = p_c^{(s)}$ .

Выявленная концентрационная зависимость динамического индекса  $z$  для двумерной сильно неупорядоченной модели Изинга с  $p \leq 0.85$  отражает проявление эффектов сингулярного динамического скейлингового поведения вблизи порога спиновой перколяции и подтверждает результаты физического эксперимента. Полученные результаты указывают на нарушение стандартной формы динамического скейлинга с  $z$  - константой, но подтверждают справедливость гипотезы обобщенного динамического скейлинга.

7. В результате компьютерного моделирования трехмерной неупорядоченной антиферромагнитной модели Изинга с конкурирующими взаимодействиями, построены фазовые диаграммы на плоскости температура - магнитное поле для нескольких значений концентраций примеси. Показано, что в области значений напряженности внешнего поля, характеризующейся слабыми эффектами случайных полей, переход в упорядоченную фазу осуществляется в виде фазового перехода II рода. Выделены значения параметров, определяющих трикритическую точку, для систем с концентрацией спинов  $p = 1.0; 0.95; 0.8$ . Определены отличающиеся по значениям критические индексы для однородной модели, неупорядоченной модели с эффектами случайной температуры ( $H = 0$ ) и эффектами случайных полей при  $H = 1$ .

8. В рамках формализма динамического производящего функционала осуществлено теоретико-полевое описание статических и динамических свойств критического поведения модели с протяженными  $\epsilon_d$  - мерными дефектами. Проведен расчет статических и динамических критических индексов в двухпетлевом приближении. Показано, что нелокальный характер взаимодействия флуктуаций параметра порядка через поле протяженных дефектов и возникающая анизотропия системы существенно изменяют динамическое критическое поведение модели. Оно характеризуется динамическими индексами  $z_{\parallel}$  и  $z_{\perp}$ , значения которых отличаются от значений для системы с  $\delta$  - коррелированными дефектами.

9. Осуществлено теоретико-полевое описание статического и динамического критического поведения неупорядоченных трехмерных систем с дальнедействующей корреляцией дефектов в двухпетлевом приближении без использования  $\epsilon, \delta$  - разложения. Для различных значений числа компонент параметра порядка  $m$  и показателя корреляции  $a$  определены типы устойчивого критического поведения и значения критических индексов. Результаты исследований существенно отличаются от полученных ранее. Выявлено, что с увеличением пространственной корреляции дефектов происходит замедление процессов критической релаксации в системе по сравнению с однородными системами и системами с  $\delta$  - коррелированными дефектами.

10. Теоретико-полевое описание мультикритического поведения непосредственно трехмерных систем с двумя параметрами порядка выявило в двухпетлевом приближении существенное изменение областей различного типа устойчивого мультикритического пове-

дения на плоскости  $(n - m)$  - числа компонент данных параметров порядка по сравнению с результатами применения  $\varepsilon$  - разложения. Это приводит к изменению характеристик мультикритического поведения и возможных типов фазовых диаграмм системы во флуктуационной области.

Показано, что присутствие примесей в системе приводит к флуктуационному расщеплению связи параметров порядка и осуществлению единственного типа устойчивого мультикритического поведения - тетракритического. В случае однокомпонентных параметров порядка  $(n = m = 1)$  наличие примесей существенно и приводит к мультикритическому поведению с индексами, соответствующими индексам неупорядоченной модели Изинга. Для систем с многокомпонентными параметрами порядка присутствие примесей не сказывается и мультикритическое поведение носит тетракритический характер однородной системы. Присутствие примесей приводит к сокращению по сравнению с однородными системами возможных типов фазовых диаграмм.

11. Показано, что фазовые превращения в пьезоэлектриках, индуцируемые системой дипольных центров при их концентрации  $N_d$  выше некоторой пороговой  $N_c$ , имеют характер сегнетоэлектрического - сегнетоэластического фазового перехода. Построенная теоретическая модель фазовых превращений позволяет непротиворечиво объяснить наблюдаемые особенности в поведении полярных полупроводниковых соединений  $A^3B^5$  в условиях сильного легирования элементами VI группы.

#### Основные результаты диссертации опубликованы в работах

1. Прудников В.В., Вакилов А.Н. Критическая динамика разбавленных магнетиков. - ЖЭТФ, 1992, т.101, N6, с.1853-1861.
2. Прудников В.В., Иванов А.В., Федоренко А.А. Критическая динамика спиновых систем в четырехпетлевом приближении. - Письма в ЖЭТФ, 1997, т.66, N12, с.793-798.
3. Прудников В.В., Белим С.В., Осипцев Е.В., Федоренко А.А. Критическая динамика неупорядоченных магнетиков в трехпетлевом приближении. - ФТТ, 1998, т.40, N8, с.1526-1531.
4. Прудников В.В., Белим С.В., Иванов А.В., Осипцев Е.В., Федоренко А.А. Критическая динамика слабо неупорядоченных спиновых систем. - ЖЭТФ, 1998, т.114, N3, с.972-984.
5. Вакилов А.Н., Прудников В.В. Компьютерное моделирование критической динамики разбавленных магнетиков. - Письма в ЖЭТФ, 1992, т.55, N12, с.709-712.
6. Прудников В.В., Вакилов А.Н. Компьютерное моделирование критической динамики разбавленных магнетиков. - ЖЭТФ, 1993, т.103, N3, с.962-969.
7. Марков О.Н., Прудников В.В. Компьютерное моделирование критической динамики неупорядоченных двумерных изинговских систем. - Письма в ЖЭТФ, 1994, т.60, N1, с.24-29.
8. Марков О.Н., Прудников В.В. Компьютерное моделирование неравновесного критического поведения неупорядоченных двумерных изинговских систем. - Известия вузов. Физика,

1994, N 8, с.83-88.

9. Prudnikov V.V., Markov O.N. Critical dynamics of disordered two-dimensional Ising systems: a Monte Carlo study. - J.Phys. A: Math. Gen., 1995, v.2, p.47-49.

10. Марков О.Н., Прудников В.В. Компьютерное моделирование критической динамики сильно неупорядоченных двумерных изинговских систем. - ФТТ, 1995, т.37, N 6, с.1574-1583.

11. Prudnikov V.V., Markov O.N. Monte Carlo renormalization group of dilute 2D Ising dynamics. - Europhysics Letters, 1995, v.29, N 3, p.245-250.

12. Прудников В.В., Марков О.Н., Осинцев Е.В. Особенности фазовых превращений в неупорядоченной антиферромагнитной модели Изинга. - ЖЭТФ, 1999, т.116, N3, с.953-961.

13. Prudnikov V.V. On the critical dynamics of disordered spin systems with extended defects. - J.Phys. C, 1983, v.16, N19, p.3685-3691.

14. Lawrie I.D., Prudnikov V.V. Static and dynamic properties of systems with extended defects: two-loop approximation. - J.Phys.C, 1984, v.17, p.1655-1668.

15. Prudnikov V.V., Fedorenko A.A. Critical behaviour of 3D systems with long-range correlated quenched defects. - J. Phys. A: Math. Gen., 1999, v.32, N36, L399-L405.

16. Prudnikov V.V., Prudnikov P.V., Fedorenko A.A. Static and dynamic critical properties of 3D systems with long-range correlated quenched defects. - J. Phys. A: Math. Gen., 1999, v.32, N49, p.8587-8600.

17. Прудников В.В., Прудников П.В., Федоренко А.А. Теоретико-полевое описание мультикритического поведения систем с двумя параметрами порядка. - Письма в ЖЭТФ, 1998, т.68, N12, с.900-905.

18. Прудников В.В., Прудников П.В., Федоренко А.А. Мультикритическое поведение слабо неупорядоченных систем с двумя параметрами порядка. - ЖЭТФ, 1999, т.116, N2, с.611-619.

19. Прудников В.В., Прудников П.В., Федоренко А.А. Мультикритическое поведение неупорядоченных систем с двумя параметрами порядка. - ФТТ, 2000, т.42, N1, с.158-162.

20. Прудников В.В., Прудникова И.А. Кооперативные явления в пьезоэлектрических кристаллах, обусловленные системой дипольных центров. - Известия вузов. Физика. 1989, N9, с.105-107.

21. Прудников В.В., Прудникова И.А. Фазовые переходы в пьезоэлектриках, обусловленные системой дипольных центров. - Кристаллография, 1992, т.37, N5, с.1093-1099.

22. Prudnikov V.V., Prudnikova I.A., Semikolenova N.A. Phase transition in heavily doped gallium arsenide. - phys. stat. solidi (b), 1994, v.181, p.87-96.







Подписано в печать 15.03.2000. Формат бумаги 60х84 1/16

Печ.л. 1,75. Уч.-изд. 1,75. Тираж 100 экз. Заказ 133.

Издательско-полиграфический отдел НОФ ОмГУ  
644077, г. Омск, пр-кт Мира, 55а, госуниверситет.





2-00